

重元素原子構造の粗視化とストキャスティックな構造

加藤太治^{1,2}、ガイガラス ゲディミナス³、田中雅臣⁴

¹核融合研、²九州大、³ビリニュス大（リトアニア）、⁴東北大

昨年夏に検出された重力波天体である連星中性子星合体[1]からの噴出物の電磁波放射（キロノヴァ）[2]には、速い中性子捕獲（r過程）により形成されるランタノイドなどの重元素イオンの放射が大きく寄与すると考えられている。宇宙の重元素起源の解明に向けて、キロノヴァの遠赤外放射スペクトルを分析するためにランタノイド元素の完全なエネルギー準位データと振動子強度データの評価が求められている。

4f電子殻を持つランタノイド元素イオンは極めて複雑な原子構造をもつため、個々のエネルギー準位の同定にはあいまいさが残る。我々は、グローバルなエネルギー準位分布構造に基づいたデータ評価の方法を研究している。

そのために、HULLACコード[3]とGRASP2Kコード[4]を用いてランタノイド元素イオンの原子構造計算をあらたに実施した[5]。計算結果の妥当性を評価するために、NISTのスペクトルデータベースから入手できる低エネルギー領域の限られたエネルギー準位の評価済みデータとの比較を行った。この計算結果に基づき、ランタノイド元素イオンのエネルギー準位分布の粗視化されたプロファイルが歪正規分布でよく表せることを明らかにした（図1）。また、ランダムに抽出したエネルギー分布のコルモゴロフスミルノフ検定を行い、確率論的にもエネルギー準位分布が歪正規分布に従うことを示した。更に、歪正規分布の分散や歪度といった統計量と、対応する電子状態との関係について物理的な考察を行った。

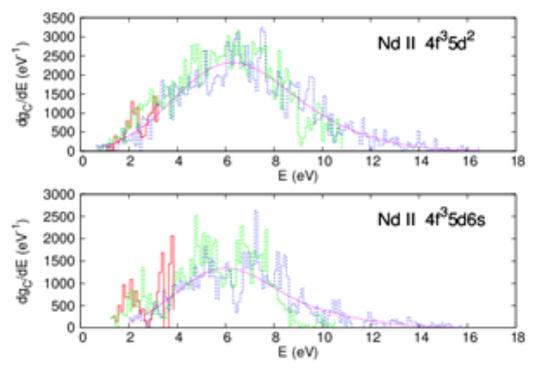


図1 Nd^{II}イオンの粗視化されたエネルギー準位分布。0.1eVの区間に含まれる準位の統計重率をプロットしたもの。青色はHULLACコード、緑色はGRASP2Kコードの計算結果、赤色はNISTデータベース。曲線は、エネルギー準位分布の1～3次のモーメントを用いた歪正規分布のプロット。

- [1] B. P. Abbott et al. Phys. Rev. Lett. 119 (2017) 161101.
- [2] Y. Utsumi et al. Publ. Astron. Soc. Japan (2017) psx118.
- [3] A. Bar-Shalom et al. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans. 71 (2001) 169.
- [4] P. Jönsson et al. Comput. Phys. Commun. 184 (2013) 2197.
- [5] M. Tanaka, D. Kato, G. Gaigalas et al. ApJ 852 (2018) 109.